Schrödinger ekvationen (partikel i låda)

Elias Almqvist

elalmqvist@gmail.com — https://wych.dev

Uppgiftbeskrivning (taget från dokumentet)

En partikel i en låda är en utav de första tillämpningarna man stöter på när man lär sig om kvantfysik. Man betraktar då en partikel (t.ex. en elektron) som befinner sig i en låda med oändligt höga väggar. För detta undersöker man partikelns vågfunktion $\psi_n(x)$. Vågfunktionen är i allmänhet en komplex funktion, dvs den har både en realdel och en imaginärdel. Vågfunktionens absolutbelopp i kvadrat, $|\psi_n(x)|^2$, representerar täthetsfunktionen för att partikeln skall befinna sig vid läge x i lådan. Om partikeln befinner sig i ett så kallat energiegentillstånd så uppfyller den den tidsoberoende Schrödinger ekvationen:

$$E_n\psi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} \tag{1}$$

där E_n är partikelns energi, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ och m är partikelns massa. Att lådans väggar är oändligt höga innebär att vågfunktionen också behöver uppfylla randvillkoren:

$$\psi_n(0) = \psi_n(L) = 0 \quad \& \quad \psi_n'(0) = \psi_n'(L) = 0 \tag{2}$$

Slutligen, eftersom $|\psi_n(x)|^2$ motsvarar sannolikhetstätheten för att partikeln skall befinna sig vid position x, så måste det gälla att:

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx \ = 1.0 \tag{3}$$

Uppgifter

1. Hitta de olika möjliga värden på E_n, och hitta motsvarande vågfunktioner $\psi_n(x)$.

2. Visa grafer över motsvarande sannolikhetsfördelningar för att partikeln skall befinna sig vid olika positioner x.

3. Partikelns fullständiga vågfunktion är egentligen även en funktion utav tiden. För en partikel som befinner sig i ett så kallat energiegentillstånd är den fullständiga vågfunktionen $\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ Dock innebär den extra faktorn $e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ inte någon intressant tidsutveckling av sannolikhetsfördelningen eftersom $|\Psi(x,t)|^2 = |\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|^2 = |\psi_n(x)|^2$. Intressantare blir det om en partikel befinner sig i en superposition av energiegentillstånd, tex:

   $$\Psi_{1,2}(x,t) = A(\psi_1(x)e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \psi_2(x)e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t})$$

   För denna vågfunktion, *bestäm konstanten A sådan att*:

   $$\int_0^L |\Psi(x,t)|^2 dx = 1.0$$

   Undersök sedan hur sannolikheten att befinna sig i den vänstra delen $0 < x < \frac{L}{2}$, respektive högra $\frac{L}{2} < x < L$ delen av lådan. Hitta alltså ett uttryck för:

   $$P(V,t) = \int_0^{\frac{L}{2}} |\Psi_n(x,t)|^2 dx$$

   $$P(H,t) = \int_{\frac{L}{2}}^{L} |\Psi_n(x,t)|^2 dx$$

4. Gör sedan samma sak för superpositionen av energiegentillstånden 1 och 3:

   $$\Psi(x,t) = A\left(\psi_1(x)e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \psi_3(x)e^{-i\frac{E_3}{\hbar}t}\right)$$

   På vilket sätt skiljer de sig? Kan du förklara varför?

Uppgiftlösningar

1

Enligt Schrödingers ekvation får vi: $E_n\psi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2}$ där $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ vilket vi kan substituera i ekvationen och vi får följande:

$$E_n\psi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2}, \quad \left[\hbar / \frac{h}{2\pi}\right]$$

$$E_n\psi_n(x) = -\frac{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{d^2\psi_n}{dx^2}\right)$$

där h är Plancks konstant och m är partikelns massa. Väljer därmed att förenkla uttrycket genom att byta ut konstanterna till en variabel (givet att $k = \frac{h^2}{8\pi^2 m}$):

$$E_n\psi_n(x) = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{d^2\psi_n}{dx^2}\right), \quad \left[\frac{h^2}{8\pi^2 m}/k\right]$$

$$E_n\psi_n(x) = -k\left(\frac{d^2\psi_n}{dx^2}\right), \quad +HL$$

$$E_n\psi_n(x) + k\left(\frac{d^2\psi_n}{dx^2}\right) = 0$$

Väljer att skriva om differentialekvationen utan Leibnizs notation och vi får:

$$E_n\psi_n + k\psi_n'' = 0, \quad /E_n$$

$$\psi_n'' + \frac{E_n}{k}\psi_n = 0$$

Vet att differentialekvationer av andra ordningen har lösningen $y = e^{\lambda x}$ och vi kan därmed beräkna λ för vår differentialekvation genom den karakteristiska ekvationen:

$$\lambda^2 + a\lambda + b = 0$$

där a och b är koefficienterna framför respektive "funktion". I vårt fall är $a = 0$ och $b = \frac{E_n}{k}$ och vi får därmed den karakteristiska ekvationen:

$$\lambda^2 + \frac{E_n}{k} = 0, \quad PQ$$

$$\lambda = \pm\sqrt{\frac{E_n}{k}}i$$

Då rötterna för den karakteristiska ekvationen är komplexa ($\in \mathbb{C}$) får vi den *allmäna funktionen*:

$$\psi_n(x) = e^{ax}\left(C\cos bx + D\sin bx\right) \quad | \quad C, D \in \mathbb{R}, \quad \lambda = a + bi$$

$$\psi_n(x) = e^0\left(C\cos \pm\sqrt{\frac{E_n}{k}}x + D\sin \pm\sqrt{\frac{E_n}{k}}x\right)$$

$$\therefore \psi_n(x) = C\cos\left(\sqrt{\frac{E_n}{k}}x\right) + D\sin\left(\sqrt{\frac{E_n}{k}}x\right) \tag{4}$$

För att finna den *partikulära vågfunktionen* måste vi ta hänsyn till villkoren 2 och 3 vilket ger:

$$\begin{cases} \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1.0, & P(1) \\ \psi_n(0) = \psi_n(L) = 0, & P(2) \\ \psi_n'(0) = \psi_n'(L) = 0, & P(3) \end{cases}$$

$P(2)$ och $P(3)$ lyder att sannolikheten att finna partikeln vid $x = 0$ eller $x = L$ är 0.0 vilket ger oss följande ekvation:

$$\psi_n(0) = C\cos\left(\sqrt{\frac{E_n}{k}}0\right) + D\sin\left(\sqrt{\frac{E_n}{k}}0\right) = 0$$

$$\psi_n(0) = C\cos(0) + D\sin(0) = 0$$

$$\implies \psi_n(0) = D\sin(0) = 0 \implies C = 0$$

Vi får därmed att $C = 0$ om $P(2)$ skall gälla! Väljer att byta ut k igen till dess ursprungliga uttryck och vi får:

$$\psi_n(x) = D\sin\left(\sqrt{\frac{E_n}{k}}x\right), \quad \left[k/\frac{h^2}{8\pi^2 m}\right]$$

$$\therefore \psi_n(x) = D\sin\left(\sqrt{\frac{8\pi^2 mE_n}{h^2}}x\right)$$

$P(2)$ lyder också att vågfunktionen skall vara 0 när $x = L$ och vi får därmed uttrycket:

$$\psi_n(L) = D\sin\left(\sqrt{\frac{8\pi^2 mE_n}{h^2}}L\right) = 0$$

$$\implies \sqrt{\frac{8\pi^2 mE_n}{h^2}}L = 0 + \eta\pi \quad | \quad \eta \in \mathbb{N}, \quad /L$$

$$\sqrt{\frac{8\pi^2 mE_n}{h^2}} = \frac{\eta\pi}{L}$$

Eftersom sannolikheten för att partikeln skall vara i lådan är alltid 1.0 ger oss följande villkor $P(1)$ [3] och vi behöver därmed *normalisera* vågfunktionen. Vi behöver alltså göra så att sannolikheten för att partikeln skall vara mellan $x = 0$ och $x = L$ är 1. Den är alltså alltid *i lådan.* D.v.s. följande:

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx \; = 1.0$$

$$\implies |\psi_n(x)|^2 = \left(D\sin\sqrt{\frac{8\pi^2 mE_n}{h^2}}x\right)^2 = D^2\sin^2\left(\sqrt{\frac{8\pi^2 mE_n}{h^2}}x\right), \quad \left[\sqrt{\frac{8\pi^2 mE_n}{h^2}}/\frac{\eta\pi}{L}\right]$$

$$|\psi_n(x)|^2 = D^2\sin^2\left(\frac{\eta\pi}{L}x\right)$$

$$\implies \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx \; = D^2\int_0^L \sin^2\left(\frac{\eta\pi}{L}x\right)dx \; = 1.0$$

Vi behöver nu beräkna integralen och få fram dess uttryck. Vi använder oss därmed av *u-substitution* och *trigonometriska ettan.* ***Låt*** $u = \frac{\eta\pi}{L}x$:

$$\int_0^L \sin^2\left(\frac{\eta\pi}{L}x\right)dx \; = \int_0^L \sin^2(u)dx$$

$$\implies \frac{du}{dx} = \frac{\eta\pi}{L} \implies dx \; = \frac{L}{\eta\pi}du$$

$$\implies \int_0^L \sin^2(u)dx \; = \frac{L}{\eta\pi}\int_0^L sin^2(u)du$$

Väljer att ***skriva om och förenkla*** $sin^2(u)$ och enlight den *trigonometriska ettan* får vi:

$$\cos(2u) = 1 - 2\sin^2 u, \quad \text{(dubbla vinkeln för cosinus)}, \quad +2\sin^2 u$$

$$\cos 2u + 2\sin^2 u = 1, \quad -\cos 2u$$

$$2\sin^2 u = 1 - \cos 2u, \quad /2$$

$$\implies \sin^2 u = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos 2u$$

Vi kan nu stoppa in vår förenklade version av $sin^2(u)$ med något vi faktiskt kan integrera:

$$\implies \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx \;= D^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{\eta\pi}{L}x\right) dx \;= D^2 \frac{L}{\eta\pi} \int_0^L \left\{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos(2u)\right\} du$$

$$= D^2 \frac{L}{2\eta\pi} \int_0^L \{1 - \cos(2u)\}\, du \;= D^2 \frac{L}{2\eta\pi} \left(\int_0^L 1du \;- \int_0^L \cos(2u)du \right)$$

$$= D^2 \frac{L}{2\eta\pi} \left[u - \int \cos(2u)du \right]_0^L$$

$$\textbf{\textit{Låt}}\ \mu = 2u$$

$$\implies \int \cos(2u)du \;= \int \cos(\mu)du$$

$$\implies \frac{d\mu}{du} = 2 \implies du \;= \frac{1}{2}d\mu$$

$$\int \cos(2u)du \;= \frac{1}{2}\int \cos(\mu)d\mu \;= -\frac{1}{2}\sin(\mu) + C$$

$$\implies \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx \;= D^2 \frac{L}{2\eta\pi}\left[u - \int \cos(2u)du\right]_0^L = D^2 \frac{L}{2\eta\pi}\left[u + \frac{1}{2}\sin\mu\right]_0^L = D^2 \frac{L}{2\eta\pi}\left[u + \frac{1}{2}\sin 2u\right]_0^L$$

$$= D^2 \frac{L}{2\eta\pi}\left[\frac{\eta\pi}{L}x + \frac{1}{2}\sin\left(2\frac{\eta\pi}{L}x\right)\right]_0^L = D^2 \frac{L}{2\eta\pi}\left(\frac{\eta\pi}{L}L + \frac{1}{2}\sin\left(2\frac{\eta\pi}{L}L\right)\right) = D^2 \frac{L}{2\eta\pi}\left(\eta\pi + \frac{1}{2}\sin(2\eta\pi)\right)$$

$$= D^2 \frac{L}{2\eta\pi}\left(\eta\pi + \frac{1}{2}\cdot 0\right) = D^2 \frac{L}{2\eta\pi}\cdot\eta\pi = D^2\frac{L}{2}$$

Vi får därmed att $\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx \;= D^2 \frac{L}{2} = 1.0$ vilket ger oss ekvationen:

$$D^2\frac{L}{2} = 1, \quad /\frac{L}{2}$$

$$D^2 = \frac{2}{L}, \quad \sqrt{\ }$$

$$\therefore D = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Därmed får vi slutligen vågfunktionen $\psi_n(x)$:

$$\therefore \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\sqrt{\frac{8\pi^2 mE_n}{h^2}}x\right) \tag{5}$$